Brillouin 関数の導出

ボルツマン因子で各 M_J 状態の占有割合を足しあげて、

$$M = \frac{-Ng\mu_B \sum_{M_J=-J}^{J} M_J \exp\left(\frac{-g\mu_B M_J H}{k_B T}\right)}{\sum_{M_J=-J}^{J} \exp\left(\frac{-g\mu_B M_J H}{k_B T}\right)}$$

が得られる。M_J に関する和を実行してブリルアン関数を求めよう。
まず、分母から考えると、-J から J までの和は、$a = \mu H/k_B T = gJ\mu_B H/k_B T$ と置くと、

$$\sum_{M_J=-J}^{J} \exp\left(-M_J a / J\right) = \frac{\exp\left(a\right) - \exp\left(-(J+1)b/J\right)}{1-\exp(-a/J)} = \frac{\exp\left(\frac{2J+1}{2J}a\right) - \exp\left(-\frac{2J+1}{2J}a\right)}{\exp(a/2J) - \exp(-a/2J)}$$

$$= \frac{\sinh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)}{\sinh\left(\frac{1}{2J}a\right)}$$

一方、分子の方は、

$$\sum_{M_J=-J}^{J} M_J \exp\left(-M_J a / J\right) = -J \frac{\partial}{\partial a} \sum_{M_J=-J}^{J} \exp\left(-M_J a / J\right)$$

と書けるので、分母の級数和の結果を用いて、

$$\sum_{M_J=-J}^{J} M_J \exp\left(-M_J a / J\right) = -J \frac{\partial}{\partial a} \frac{\sinh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)}{\sinh\left(\frac{1}{2J}a\right)}$$

$$= -J \frac{\frac{2J+1}{2J}\cosh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)\sinh\left(\frac{1}{2J}a\right) - \frac{1}{2J}\cosh\left(\frac{1}{2J}a\right)\sinh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)}{\sinh^2\left(\frac{1}{2J}a\right)}$$

が得られる。従って、磁化 M は、

$$M = Ng\mu_B J \frac{\frac{2J+1}{2J}\cosh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)\sinh\left(\frac{1}{2J}a\right) - \frac{1}{2J}\cosh\left(\frac{1}{2J}a\right)\sinh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)}{\sinh^2\left(\frac{1}{2J}a\right)} \frac{\sinh\left(\frac{1}{2J}a\right)}{\sinh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)}$$

$$= Ng\mu_B J \left\{\left(\frac{2J+1}{2J}\right)\coth\left(\frac{2J+1}{2J}a\right) - \frac{1}{2J}\coth\left(\frac{1}{2J}a\right)\right\} = Ng\mu_B J B_J(a)$$

が得られる。ここで、ブリルアン関数 $B_J(a)$ は、$a = \mu H/k_{\mathrm{B}}T = gJ\mu_{\mathrm{B}}H/k_{\mathrm{B}}T$ の関数として、

$$B_J(a) = \frac{2J+1}{2J}\coth\left(\frac{2J+1}{2J}a\right) - \frac{1}{2J}\coth\left(\frac{1}{2J}a\right)$$

で与えられる。

$a << 1$ （$k_{\mathrm{B}}T >> g\mu_{\mathrm{B}}JH$）を満たすような高温領域では、

$$\coth x = \frac{\cosh x}{\sinh x} = \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} \approx \frac{(1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}+\frac{x^4}{4!})+(1-x+\frac{x^2}{2!}-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^4}{4!})}{(1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!})-(1-x+\frac{x^2}{2!}-\frac{x^3}{3!})} = \frac{1+\frac{x^2}{2}+\frac{x^4}{24}}{x+\frac{x^3}{6}}$$

$$= \frac{\frac{24+12x^2+x^4}{24}}{\frac{6x+x^3}{6}} = \frac{24+12x^2+x^4}{x(24+4x^2)} = \frac{1}{x}\left(1+\frac{x^2}{3}\frac{8+x^2}{8+4x^2/3}\right) = \frac{1}{x}\left(1+\frac{x^2}{3}\left(1-\frac{x^2/3}{8+4x^2/3}\right)\right)$$

$$\approx \frac{1}{x} + \frac{x}{3}$$

と近似できるので、

$$B_J(a) \approx \frac{2J+1}{2J}\left(\frac{1}{\frac{2J+1}{2J}a} + \frac{2J+1}{6J}a\right) - \frac{1}{2J}\left(\frac{2J}{a} + \frac{1}{6J}a\right) = \left(\frac{1}{a} + \frac{(2J+1)^2}{12J^2}a\right) - \left(\frac{1}{a} + \frac{1}{12J^2}a\right)$$

$$= \frac{(2J+1)^2}{12J^2}a - \frac{1}{12J^2}a = \frac{4J^2+4J+1-1}{12J^2}a = \frac{J+1}{3J}a$$

従って、磁化は、

$$M = Ng\mu_B J\frac{J+1}{3J}\frac{g\mu_B J}{k_B T}H = \frac{Ng^2{\mu_B}^2 J(J+1)}{3k_B T}H$$

と、温度の逆数に比例する、キュリー則が得られる。

Brillouin 関数の導出２

g-因子が g で、角運動量 J を持つ磁気モーメントの N 個の集団の全磁気モーメントを表す Brillouin 関数を求める。分配関数 Z、$F=-k_B T\log Z$、$N\mu=-\partial F/\partial T$ を用いて、

$$Z=\left\{\frac{\sinh\left(\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}(J+1/2)H}{k_{\mathrm{B}}T}\right)}{\sinh\left(\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}H}{2k_{\mathrm{B}}T}\right)}\right\}^N$$

を $N\mu=k_BT\dfrac{\partial}{\partial H}\log Z$ に代入して、

$$N\mu=Nk_BT\frac{\partial}{\partial H}\log\left\{\frac{\sinh\left(\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}(J+1/2)H}{k_{\mathrm{B}}T}\right)}{\sinh\left(\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}H}{2k_{\mathrm{B}}T}\right)}\right\}$$

$$=Nk_BT\frac{\partial}{\partial H}\left\{\log\left[\sinh\left(\frac{g\mu_{\mathrm{B}}(J+1/2)H}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right]-\log\left[\sinh\left(\frac{g\mu_{\mathrm{B}}H}{2k_{\mathrm{B}}T}\right)\right]\right\}$$

$$=Nk_BT\left\{\frac{\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}(J+1/2)}{k_{\mathrm{B}}T}\cosh\left(\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}(J+1/2)H}{k_{\mathrm{B}}T}\right)}{\sinh\left(\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}(J+1/2)H}{k_{\mathrm{B}}T}\right)}-\frac{\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}}{2k_{\mathrm{B}}T}\cosh\left(\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}H}{2k_{\mathrm{B}}T}\right)}{\sinh\left(\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}H}{2k_{\mathrm{B}}T}\right)}\right\}$$

$$=Ng\mu_{\mathrm{B}}J\left\{\frac{(2J+1)\cosh\left(\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}(J+1/2)H}{k_{\mathrm{B}}T}\right)}{2J\sinh\left(\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}(J+1/2)H}{k_{\mathrm{B}}T}\right)}-\frac{\cosh\left(\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}H}{2k_{\mathrm{B}}T}\right)}{2J\sinh\left(\dfrac{g\mu_{\mathrm{B}}H}{2k_{\mathrm{B}}T}\right)}\right\}$$

ここで、

$$a=\frac{\mu H}{k_BT}=\frac{g\mu_BJH}{k_BT}$$

と置くと、

$$=Ng\mu_{\mathrm{B}}J\left\{\frac{(2J+1)}{2J}\coth\left(\frac{(2J+1)}{2J}a\right)-\frac{1}{2J}\coth\left(\frac{1}{2J}a\right)\right\}=Ng\mu_{\mathrm{B}}JB_J(a)$$

が得られる。